

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 53

Сентябрь-октябрь

№ 5, 2012

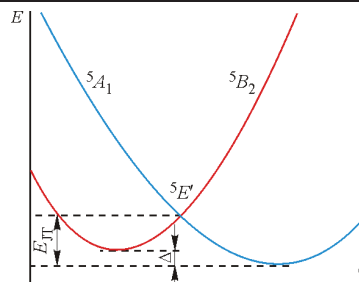
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Соломоник В.Г., Муханов А.А.

Строение и спектры молекул трифторидов марганца, железа и кобальта: исследование методом CCSD(T) в полном базисе

Ключевые слова: трифторид марганца, трифторид железа, трифторид кобальта, строение молекул, эффект Яна–Теллера, частоты колебаний, энтальпия атомизации, метод связанных кластеров, экстраполяция к пределу полного базисного набора

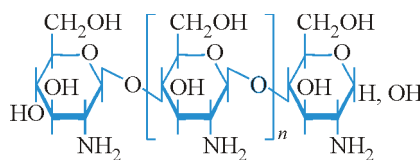


839

Азимов Дж., Маматкулов Ш., Тураева Н.,
Оксенгендлер Б.Л., Рашидова С.Ш.

Компьютерное моделирование адсорбции хитозана на углеродную нанотрубку

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, хитозан, адсорбция, молекулярная динамика



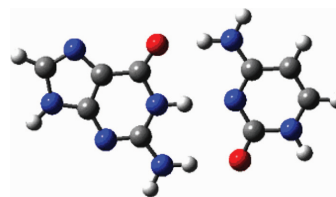
849

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Тен Г.Н., Яковлева А.А., Нечаев В.В., Баранов В.И.

Влияние водородной связи на структуру и колебательные спектры комплементарных пар оснований нуклеиновых кислот. III. Гуанин-цитозин

Ключевые слова: гуанин, цитозин, комплементарная пара, колебательные спектры, водородная связь

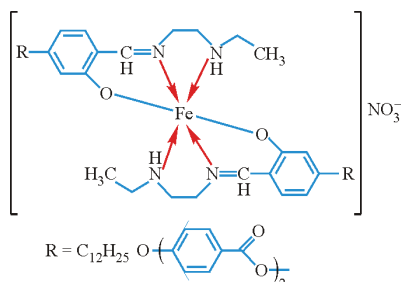


855

Груздев М.С., Червонова У.В., Колкер А.М.,
Голубева А.С.

Влияние растворителя при получении азометиновых комплексов железа(III) на основе 4,4'-додецилоксибензоилоксибензоил-4-салицилиден-N'-этил-N-этилендиамина

Ключевые слова: азометины, строение, влияние растворителя, комплексы железа(III), масс-спектрометрия, ИК спектроскопия

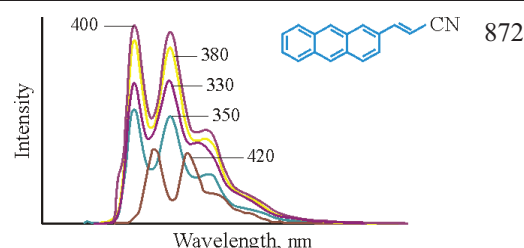


865

Srinivas U., Arun Kumar P., Srinivas Kolupula, Bhanuprakash K., Jayathirtha Rao V.

Conformational analysis of 2-anthrylethylene derivatives: photochemical and computational investigation

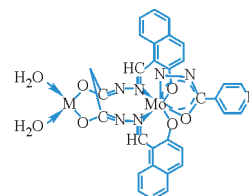
Keywords: 2-anthrylethylene derivatives, photochemical *cis-trans* isomerization, fluorescence, charge transfer, conformational analysis, theoretical studies



Kumar A., Chanu O.B., Borthakur R., Lal R.A.

Characterization of heterobimetallic and mixed-valence complexes of molybdenum(V) derived from bis(2-hydroxy-1-naphthaldehyde)malonoyldihydrazone

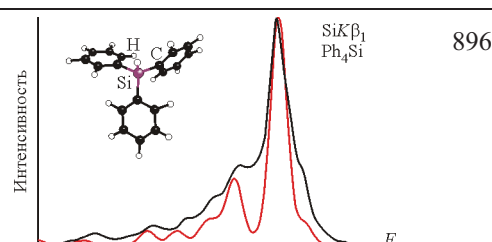
Keywords: synthesis, characterization, molybdenum(V), heterometal, hydrazone, spectroscopic studies



Даниленко Т.Н., Татевосян М.М., Власенко В.Г.

Исследование электронного строения фенилсиланов методами рентгеновской эмиссионной спектроскопии и квантово-химических расчетов

Ключевые слова: электронное строение, фенилсиланы, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, теория функционала плотности

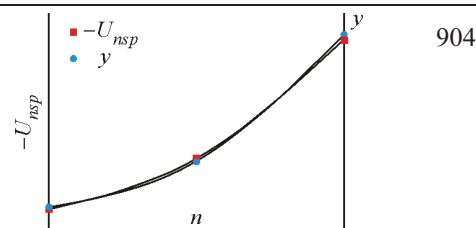


СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Зайчиков А.М.

Структурно-термодинамические характеристики амидных растворителей

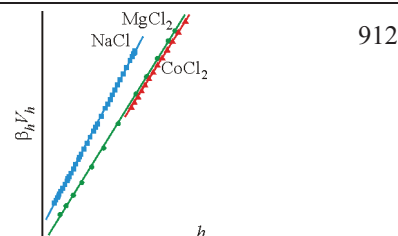
Ключевые слова: внутреннее давление, межмолекулярные взаимодействия, структурно-термодинамические характеристики, амидные растворители



Афанасьев В.Н., Устинов А.Н.

Ионная сольватация водных растворов галогенидов щелочных, щелочноземельных и переходных металлов

Ключевые слова: ионная сольватация, адиабатическая сжимаемость, координационные соединения, числа сольватации

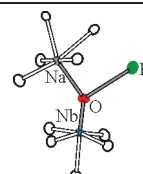


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Васильев А.Д., Лапташ Н.М.

Полиморфизм кристаллов KNaNbOF₅

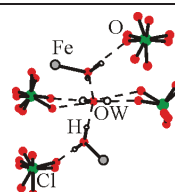
Ключевые слова: оксопентафторониобат калия-натрия, кристаллическая структура, О/Ф порядок, «конкомитантный» полиморфизм



Скогарева Л.С., Шилов Г.В., Карелин А.И.

Кристаллическая структура и спектры КР [Fe(H₂O)₆]³⁺(ClO₄)₃ · 3H₂O

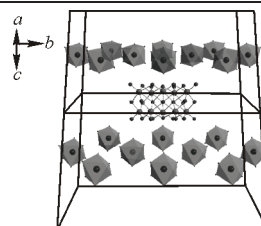
Ключевые слова: нонагидрат перхлората железа(III), кристаллическая структура, спектры КР



Luo S.-Y., Wu X.-L., Hu Q.-P., Wang J.-X., Liu C.-Z., Sun Y.-Y.

Structural characterization of a new decavanadate compound with organic molecules and inorganic ions

Keywords: decavanadate cluster, three-dimensional array, crystal structure, single crystal X-ray analysis, metal-organic compounds

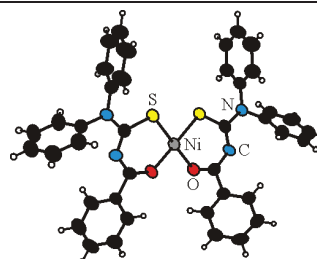


935

Pérez H., Corrêa R.S., O'Reilly B., Plutín A.M., Silva C.C.P., Mascarenhas Y.P.

Spectroscopic characterization and crystal structure of *cis*-bis(*N*-(2-benzoyl)-*N'*,*N'*-diphenylthioureato-*k*²O,*S*)nickel(II)

Keywords: nickel(II) complex, acylthiourea derivatives, spectroscopic analysis, crystal structure, molecular assembly, Hirshfeld surface

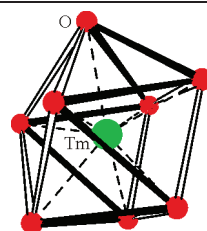


941

Czyłkowska A., Kruszyński R., Kaczmarek A., Markiewicz M.

Crystal structure of the compounds [Ln(H₂O)₈](CCl₃COO)₄·(H₂O)₄·(4-bpy)₂·(4-bpyH)⁺ (Ln(III)=Gd, Tb, Er and Tm)

Keywords: lanthanide compounds, 4,4'-bipyridine, trichloroacetates, crystal structures

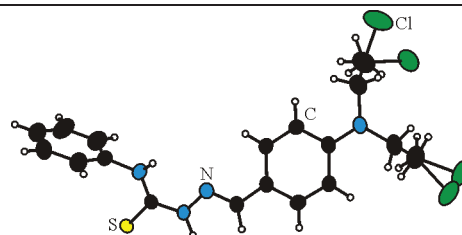


946

Anitha S., Karthikeyan J., Nityananda Shetty A.

Molecular structure and conformation study of *p*-[*N*,*N*-bis(2-chloroethyl)aminobenzaldehyde-4-phenyl thiosemicarbazone

Keywords: phenyl thiosemicarbazone, thiosemicarbazone, *p*-[*N*,*N*-bis(2-chloroethyl)aminobenzaldehyde – 4-phenyl thiosemicarbazone, spectral studies

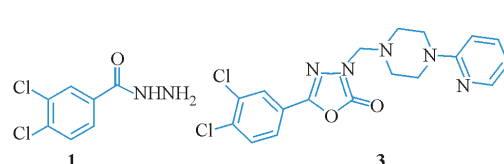


951

Şahin Z.S., Özkan İ., Köksal M., Işık Ş.

5-(3,4-Dichlorophenyl)-3-{[4-(2-pyridyl)piperazine-1-yl]methyl}-1,3,4-oxadiazole-2(3H)-one: synthesis, characterization, X-ray and DFT structures

Keywords: 1,3,4-oxadiazole, piperazine ring, synthesis, X-ray crystallography, DFT

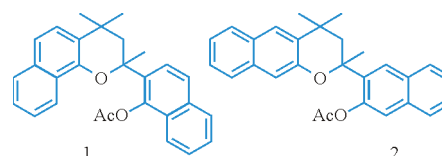


957

Srinivasan B.R., Ragavaiah P., Shirsat R.N., Menezes J.C.J.M.D.S., Kamat S.P.

Single crystal X-ray analysis of the isomeric 2-(2,4,4-trimethyl-3,4-dihydro-2*H*-benzo[*h*]chromen-2-yl)-1-naphthyl acetate and 3-(2,4,4-trimethyl-3,4-dihydro-2*H*-benzo[*g*]chromen-2-yl)-2-naphthyl acetate

Keywords: 2-(2,4,4-trimethyl-3,4-dihydro-2*H*-benzo[*h*]chromen-2-yl)-1-naphthyl acetate, 3-(2,4,4-trimethyl-3,4-dihydro-2*H*-benzo[*g*]chromen-2-yl)-2-naphthyl acetate, naphthopyran, benzoflavans, crystal structure, structural isomers

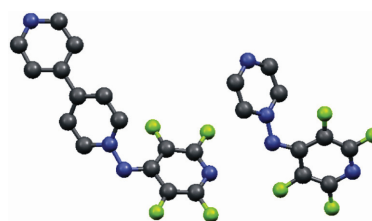


962

Бородин Г.И., Воробьев А.Ю., Гатилов Ю.В.

Молекулярная и кристаллическая структура (пирозиний-1)(перфторпиридин-4-ил) и (4,4'-бипиридил)-1-ил(перфторпиридин-4-ил) амидов

Ключевые слова: N-имины бипиридила и пиразина, C–F–π-взаимодействия, π-стекинг, водородная связь, РСА, квантово-химические расчеты



967